



太原理工大学山西省煤科学与技术重点实验室—  
省部共建国家重点实验室培育基地

量子化学课题组

2012年度报告

## 卷首语

光阴如梭，一年的工作转瞬又将成为历史，我们告别2012年，迎来充满未知与希冀的2013年。回望2012年，我们心存感激，感谢那些支持我们、帮助我们的人，使得我们在2012年取得了各方面的进展。

2012年，课题组新增两项国家自然科学基金、一项博士后基金；

2012年，课题组发表SCI论文18篇，赶超去年；

2012年，课题组首次与国外作者合作出版英文专著一部；

2012年，一位博士和五位硕士顺利毕业，又迎来一位博士生、五位硕士生及三位合作的硕士生，给实验室注入了新鲜血液；

2012年，课题组章日光老师获得第三届“晋昌”博士创新奖励基金。

当2013年的阳光开始普照大地的时候，面对新的起点，新的目标，新的挑战，我们将一如既往、信心百倍、激情满怀。



### 课题组成员

#### 课题组老师:

王宝俊: 教授、博导

章日光、凌丽霞: 讲师



#### 研究生:

博士生: 智翠梅、侯锦秀、吴建兵

研 三: 李静蕊、孙炫成、宋佳佳

研 二: 王贵儒、牛晓琦、张通、王刚、王勇 (合作)、  
齐君 (合作)

研 一: 刘志雪、郭晓强、赵晓俊、章丽娜、赵森鹏、  
管涛涛 (合作)

## 2012年在研基金项目

### 1. 热解和气化煤气中含硫化合物的转化和脱除

**研究目标:**

从分子水平上阐明热解和气化煤气中含硫化合物化学键断裂方式，硫在催化转化和脱硫过程中的变化规律，及催化剂和脱硫剂的微观结构和效能关系。从而在实践上为优化含硫化合物转化和脱硫的工艺条件建立基本的理论方法，为高效催化剂和高效易再生脱硫剂的筛选提供基本的理论线索。

**基金支持:** 国家自然科学基金项目 (60976115) , 经费34万元

**起止年月:** 2010.01~2012.12

**项目负责人:** 王宝俊

### 2. CH<sub>4</sub>-CO<sub>2</sub>等温两步反应合成乙酸的热力学、动力学研究

**研究目标:**

阐明CH<sub>4</sub>-CO<sub>2</sub>两步梯阶转化直接合成乙酸的反应热力学、动力学基础，建立一个能够比较准确地描述两步反应热力学、动力学的模型体系和方法。

**基金支持:** 国家自然科学基金青年基金 (20906066) , 经费20万元

**起止年月:** 2010.01~2012.12

**项目负责人:** 章日光



### 3. 煤气脱硫机理的量子化学研究

#### 研究目标:

依托量子化学密度泛函理论计算方法, 研究氧化铝和氧化铁为基体的催化剂和脱硫剂作用下的脱硫反应, 从分子水平阐明催化转化和脱硫反应, 从电子-分子水平阐明其作用原理。统一阐明不含硫组分对催化和脱硫过程的影响。项目可以为高效转化剂和高效易再生脱硫剂的筛选和金属掺杂改性, 以及优化工艺条件提供基本的理论线索。

**基金支持:** 教育部博士点基金 (20091402110013), 经费3万元

**起止年月:** 2010.01~2014.12

**项目负责人:** 王宝俊

### 4. 热解和气化煤气中 $H_2S$ 和 $Hg$ 同时脱除的理论研究

#### 研究目标:

a) 从分子水平上阐明 $H_2S$ 和含 $Hg$ 物种在脱除剂表面的吸附机理和它们在脱除过程中的变化规律, 阐明脱除剂的微观结构和效能的关系; b) 构建 $H_2S$ 和含 $Hg$ 物种在脱除剂表面的共吸附模型, 得到以基元反应为基础的同时脱除的反应机理; c) 在实践上提供理论线索; 在理论上建立一套基于基元反应的脱除反应机理。

**基金支持:** 国家自然科学基金青年基金 (21103120), 经费25万元

**起止年月:** 2012.01~2014.12

**项目负责人:** 凌丽霞

5. 铁基氧化物对煤气中 $\text{H}_2\text{S}$ 和 $\text{Hg}^0$ 同时脱除的微观动力学研究

研究目标:

a) 阐明 $\text{H}_2\text{S}$ 和 $\text{Hg}^0$ 在 $\text{Fe}_2\text{O}_3$ 作用下的共脱除反应机理, 为 $\text{H}_2\text{S}$ 和 $\text{Hg}^0$ 的共脱除提供理论指导; b) 通过对 $\text{Fe}_2\text{O}_3$ 表面掺杂改性的研究, 为高效脱硫脱汞的脱除剂的筛选和金属掺杂改性提供基本的理论线索

基金支持: 第52批博士后基金 (2012M520608) , 经费5万元

起止年月: 2012.09~2013.06

项目负责人: 凌丽霞

## 2012年新获批项目

### 1. Ni基催化剂作用下CH<sub>4</sub>/CO<sub>2</sub>重整反应体系中积碳问题

#### 研究目标:

采用量子化学DFT理论计算和结构表征相结合的方法，建立积碳生成的微观动力学，在电子水平上阐明积碳问题的微观原因，及催化剂的成分、组成、微晶和表面结构等主要因素与抗积碳性能的构效关系，为Ni基催化剂的筛选和改性，以及有针对性地设计新型催化剂，提供基本的理论线索。

**基金支持:** 国家自然科学基金 (21276171) ，经费82万元

**起止年月:** 2013.01~2016.12

**项目负责人:** 王宝俊

### 2. 甲烷-合成气两步梯阶反应合成乙酸的反应机理

#### 研究目标:

对甲烷-合成气两步梯阶反应合成乙酸进行研究，采用量子化学计算和实验相结合的方法，从催化剂构效关系、反应热力学和动力学方面阐明金属催化剂作用下甲烷-合成气两步梯阶反应合成乙酸的反应机理，为实验筛选并提出适宜的金属催化剂。

**基金支持:** 国家自然科学基金青年—面上连续资助项目 (21276003) ，经费80万元

**起止年月:** 2013.01~2016.12

**项目负责人:** 章日光

2012年发表的学术论文

- 1. Riguang Zhang, Luzhi Song, Hongyan Liu, Baojun Wang. The interaction mechanism of CO<sub>2</sub> with CH<sub>3</sub> and H on Cu(111) surface in synthesis of acetic acid from CH<sub>4</sub>/CO<sub>2</sub>: A DFT study. Applied Catalysis A: General, 2012, 443-444: 50-58(SCI)**
- 2. Riguang Zhang, Hongyan Liu, Baojun Wang, Lixia Ling. Insights into the preference of CO<sub>2</sub> formation from HCOOH decomposition on Pd Surface: A theoretical study. Journal of Physical Chemistry C, 2012, 116(42): 22266-22280(SCI)**
- 3. Riguang Zhang, Hongyan Liu, Baojun Wang, Lixia Ling. Insights into the effect of surface hydroxyls on CO<sub>2</sub> hydrogenation over Pd/ $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalyst: A computational study. Applied Catalysis B: Environmental, 2012, 126: 108-120(SCI)**
- 4. Riguang Zhang, Hongyan Liu, Jingrui Li, Lixia Ling, Baojun Wang. A mechanistic study of H<sub>2</sub>S adsorption and dissociation on Cu<sub>2</sub>O(111) surfaces: Thermochemistry, reaction barrier. Applied Surface Science, 2012, 258(24): 9932-9943(SCI)**
- 5. Riguang Zhang, Luzhi Song, Baojun Wang, Zhong Li. A density functional theory investigation on the mechanism and kinetics of dimethyl carbonate formation on Cu<sub>2</sub>O catalyst. Journal of Computational Chemistry, 2012, 33(11): 1101-1110(SCI)**

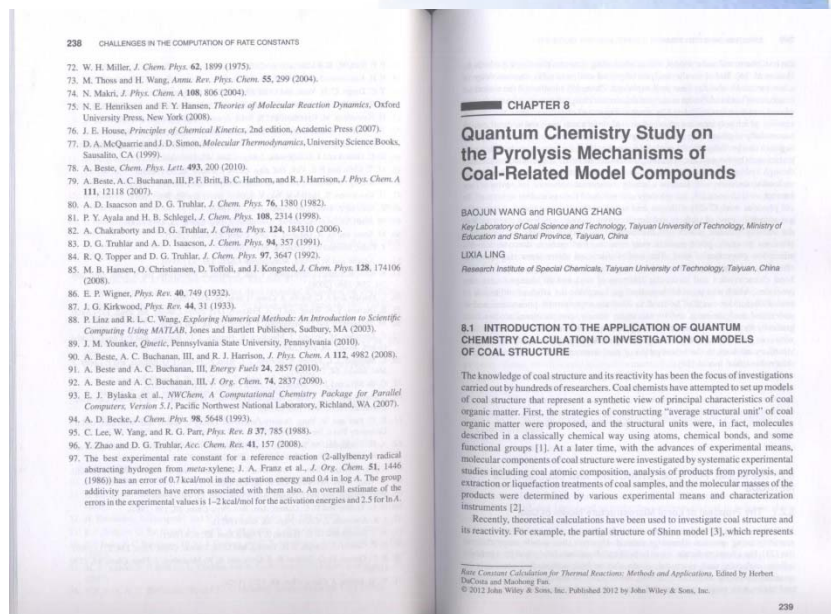
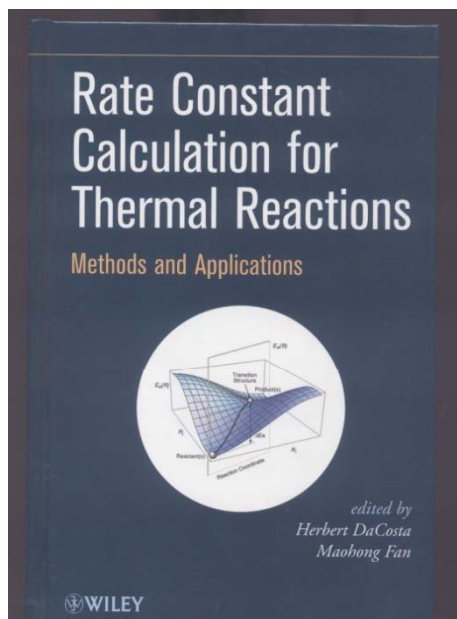


- 6. Baojun Wang, Ruixia Yan, Hongyan Liu. Effects of interactions between NiM (M = Mn, Fe, Co and Cu) bimetals with MgO(100) on the adsorption of CO<sub>2</sub>. Applied Surface Science, 2012, 258(22): 8831-8836(SCI)**
- 7. Baojun Wang, Luzhi Song, Riguang Zhang. The dehydrogenation of CH<sub>4</sub> on Rh(111), Rh(110) and Rh(100) surfaces: A density functional theory study. Applied Surface Science, 2012, 258(8): 3714-3722(SCI)**
- 8. Jianming Liang, Riguang Zhang, Qiang Zhao, Jinxiang Dong, Baojun Wang, Jinping Li. Molecular simulation of hydrogen storage in ion-exchanged Mazzite and Levyne zeolites. Computational and Theoretical Chemistry, 2012, 980: 1-6(SCI)**
- 9. Riguang Zhang, Luzhi Song, Baojun Wang. Insight into the adsorption and dissociation of CH<sub>4</sub> on Pt(h k l) surfaces: A theoretical study. Applied Surface Science, 2012, 258(18): 7154-7160(SCI)**
- 10. Baojun Wang, Liping Wang, Riguang Zhang, Lixia Ling. The role of CS<sub>2</sub> in CS<sub>2</sub>/NMP mixed solvent in weakening the hydrogen bond of OH–N in coal: a DFT investigation. Journal of Molecular Modeling, 2012, 18(3): 921-927(SCI)**
- 11. Riguang Zhang, Lixia Ling, Baojun Wang. Density functional theory analysis of carbonyl sulfide hydrolysis: effect of solvation and nucleophile variation. Journal of Molecular Modeling, 2012, 18(4): 1255-1262(SCI)**

12. Hongyan Liu, Riguang Zhang, Ruixia Yan, Jingrui Li, Baojun Wang, Kechang Xie. Insight into CH<sub>4</sub> dissociation on NiCu catalyst: A first-principles study. *Applied Surface Science*, 2012, 258(20): 8177-8184(SCI)
13. Lixia Ling, Riguang, Zhang, Peide Han, Baojun Wang. A theoretical study on the hydrolysis mechanism of carbon disulfide. *Journal of Molecular Modeling*, 2012, 18(4):1625-1632(SCI)
14. Lixia Ling, Jianbing Wu, Jiajia Song, Peide Han, Baojun Wang. The adsorption and dissociation of H<sub>2</sub>S on the oxygen-deficient ZnO (10 $\bar{1}$ 0) surface: A density functional theory study. *Computational and Theoretical Chemistry*, 2012, 1000: 26-32(SCI)
15. 解晓东, 郝玉英, 章日光, 王宝俊. Li掺杂8-羟基喹啉铝的密度泛函理论研究. *物理学报*, 2012, 61: 127201-1-7(SCI)
16. 薛金祥, 章日光, 刘燕萍, 王宝俊. Ti, C, N在 $\alpha$ -Fe基中的合金化效应及对键合性质的影响. *物理学报*, 2012, 61: 127101-1-8(SCI)
17. 吴建兵, 李萍, 马国章, 凌丽霞, 王宝俊. 一种可聚合光引发剂的合成及性能. *高分子材料科学与工程*, 2012, 28(9): 5-8(EI)
18. 阎瑞霞, 刘红艳, 王宝俊. NiM双金属和 $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 的相互作用及对CO<sub>2</sub>吸附的影响. *煤炭转化*, 2012, 35(4): 84-88

### 2012年发表的论著

**Baojun Wang, Riguang Zhang, Lixia Ling. Rate Constant Calculation for Thermal Reactions: Methods and Applications. Chapter 8. Quantum Chemistry Study on the Pyrolysis Mechanisms of Coal-Related Model Compounds, John Wiley & Sons Press, 2012-2-22**



## 2012年课题组参加的学术会议

- 王宝俊教授和凌丽霞博士参加了“国家科技重大专项项目—油气开发专项项目40‘煤层气与煤炭协调开发关键技术（二期）’课题实施方案暨2011年度执行情况汇报大会”。

2012.1.4 ~ 2012.1.6

会议概况：

五个分课题的各题长主要对本课题的实施方案、技术路线以及2011年度的进展情况等进行详细汇报。（太原理工大学参与的第五课题由河南理工大学的张子敏教授进行汇报）

- 刘红艳博士参加了在四川大学举办的中国化学会第28届学术年会，中国·成都。2012.4.1

交流论文：

刘红艳 《金属-载体相互作用及其对 $\text{CH}_4/\text{CO}_2$ 重整反应中积碳的影响》

凌丽霞 《The sulfidation and regeneration mechanisms during the desulfurization of  $\text{H}_2\text{S}$  by  $\text{ZnO}$ 》

- 王宝俊教授和刘红艳博士参加了“第六届国际分子模拟与信息技术应用学术会议”，中国·南京。2012.5.13~2012.5.15

大会报告：

王宝俊《Ni基双金属催化CH<sub>4</sub>/CO<sub>2</sub>重整反应中积碳问题的研究》

- 王宝俊教授，凌丽霞和侯锦秀博士参加了“国家科技重大专项项目—油气开发专项项目40‘煤层气与煤炭协调开发关键技术（二期）’2012年度执行情况汇报大会”。2012.12.4~2012.12.6

会议概况：

五个分课题的各题长主要对本课题2012年度的进展情况进行详细汇报。

（太原理工大学参与的第五课题由河南理工大学的张子敏教授进行汇报）



## 2012年课题组学术交流活动

**2012.01.13** 材料科学与工程学院韩培德教授带领其课题组成员来我课题组进行了学术交流，黄伟、刘燕萍、郝玉英等教授参加了此次交流活动，本次学术活动由王宝俊教授主持，三名博士生做了学术报告。

**2012.03.16** 本课题组两位硕士生王刚和张通作为联合培养对象，到山西省应用化学研究所进行硕士生课题的研究。

**2012.03.23** 山西大学魏学红教授来我课题组参观。章日光老师详细介绍了课题组的研究方向，已有的软硬件设备，发表的论文和申请项目情况。

**2012.04.23** 由李忠教授带领河北工业大学几位老师来我课题组参观。章日光老师向各位老师介绍了我课题组的主要研究方向及设备、资源等情况，并带领各位老师参观了课题组的实验室。

**2012.05.20** 北京理工大学冯金生教授来我课题组参观。王宝俊教授向两位老师介绍了课题组近年来所承担的项目、发表的文章以及软硬件设施等。

- 2012.05.24** 高志华老师带领化学化工学院11级同学来我课题组参观，王宝俊教授给同学们介绍了课题组研究情况，随后同学们观看了课题组成员对计算实例的演示。
- 2012.08.13** 王宝俊教授和课题组老师到山西应用化学研究所指导联合培养硕士生王刚和张通两位同学近期的研究工作。
- 2012.08.23** 山西大学王越奎教授、中北大学曹端林教授、山西应用化学研究所马国章教授、本校化工学院李瑞丰教授、煤化工研究所冯杰教授、材料学院王晓敏教授及物理与光电学院郝玉英教授参加我课题组09级博士研究生章日光的开题及中期报告。
- 2012.09.26** Ken Andson教授和Francois Botha博士来我课题组参观，章日光老师带他们参观了本课题组，并向他们介绍了课题组的软硬件设施以及研究方向。

### 2012年毕业的学生



姓 名：刘红艳  
毕业去向：美国怀俄明大学 化学与石油工程系访问学者  
论文题目：Ni基双金属催化 $\text{CH}_4/\text{CO}_2$ 重整反应中积碳问题的研究



姓 名：宋录智  
毕业去向：孝义市兴安化工有限公司  
论文题目：甲烷在金属表面解离的微观机理研究



姓 名：薛金祥（合作）  
毕业去向：京东方科技集团股份有限公司技术中心  
论文题目：Ti、C、N在Fe基中合金化效应的理论研究

2012年6月毕业的学生



姓 名: 胡文飞 (合作)  
毕业去向: 徐工集团建设机械有限公司  
论文题目: 基于扁球壳跳跃屈曲理论的分子环翻转  
反应机理初步研究



姓 名: 阎瑞霞  
毕业去向: 山西智诚达能源咨询有限公司  
论文题目: Ni基双金属和载体之间的相互作用及  
其对CO<sub>2</sub>吸附和解离的影响



姓 名: 解晓东 (合作)  
论文题目: 掺杂型载流子传输材料的密度泛函理论  
研究



### 2011-2012学年第二学期工作汇报安排

时间	汇报内容	报告人
3月01日	大论文写作进展情况以及存在的问题	薛金祥, 阎瑞霞, 宋录智, 胡文飞, 解晓东
3月08日	课题进展	智翠梅
3月22日	开题报告	宋佳佳, 李静蕊, 孙炫成
3月29日	软件学习情况	牛晓琦, 王刚, 张通, 王贵儒
4月19日	开题及近期工作汇报	宋佳佳, 牛晓琦, 王刚, 张通, 王贵儒
5月10日	预答辩	薛金祥, 阎瑞霞, 胡文飞, 解晓东, 刘红艳
5月17日	课题进展	宋佳佳, 李静蕊, 孙炫成
5月24日	近期工作汇报	智翠梅
6月03日	预答辩	阎瑞霞, 宋录智
6月07日	预开题报告、课题进展情况	牛晓琦, 王刚, 张通, 王贵儒, 宋佳佳, 李静蕊, 孙炫成
6月21日	近期工作汇报	宋佳佳, 李静蕊, 孙炫成
7月05日	暑假安排	全体学生



## 2012-2013学年第一学期工作汇报安排

时间	汇报内容	报告人	主持人
9月13日	假期任务完成情况及本学期安排	宋佳佳, 李静蕊, 孙炫成	--
9月27日	假期任务完成情况及本学期安排	王贵儒, 牛晓琦, 王刚, 张通, 智翠梅	--
10月18日	近期工作汇报	宋佳佳, 李静蕊, 孙炫成	--
11月01日	近期工作汇报	王贵儒, 牛晓琦, 王刚, 张通	管涛涛
11月08日	近期工作汇报	齐君, 王勇	章丽娜
11月22日	课题完成情况及课题进展	宋佳佳, 李静蕊, 孙炫成, 智翠梅	郭晓强
11月29日	开题报告	王贵儒, 牛晓琦, 王刚, 张通	王勇
12月07日	近期工作汇报	智翠梅, 齐君, 王勇	赵森鹏
12月13日	开题报告	王刚, 张通	凌丽霞
12月20日	大论文提纲汇报	宋佳佳, 李静蕊, 孙炫成	齐君
12月27日	大论文提纲修改、开题中期汇报	李静蕊, 孙炫成, 王贵儒	赵晓俊
1月10日	开题报告	智翠梅, 齐君, 王勇	赵森鹏
1月17日	假期安排	全体学生	章日光

生活缩影



课题组老师及2008-2011届学生

生活缩影



划竹筏



空中吊桥



已毕业的，正在毕业的，尚未毕业的



# Quantum Chemistry Research Group

Annual Report

2012

## 生活缩影



师生自助烧烤



悠悠桥



2012届毕业生及课题组老师



2012届毕业硕士生阎瑞霞工作照

生活缩影



王丽平和其爱人结婚照



曹建伟和荆雯结婚照



生活缩影



刘红艳在美国怀俄明大学工程楼前



李敏的宝宝

生活缩影



2012届毕业硕士生胡文飞工作照



2012届毕业聚餐



每周的羽毛球比赛



学术活动过程中王老师与章老师就表面问题讨论

发现问题、提出问题、  
分析问题、解决问题

感谢国家自然科学基金提供项目支持！

感谢煤科学重点实验室各位老师的帮助！